

Вплив неоднорідної деформації границі поділу квантова точка-матриця на квантово-розмірні стани

Кулик Н.Я., Лазурчак Л.В., Забілик М.В.

email: delenkonadia@mail.ru

кафедра загальної фізики

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка
вул.Стрийська,3, Дрогобич, Львівська обл.,82100

В рамках моделі деформаційного потенціалу розраховані компоненти тензора деформації матеріалу аксіально - деформованої сферичної квантової точки в матриці. Проведено розвиток теорії збурення форми напруженої гетерограниці "квантова точка-матриця", за допомогою якої досліджено вплив неоднорідно-деформованої квантової точки на квантово-механічні стани зарядів, локалізованих всередині неї.

Ключові слова: деформаційний потенціал, теорія збурення форми квантової точки, рівняння механічної рівноваги, рівняння Шредінгера.

ВСТУП

З сучасним розвитком нанотехнологій і фізики квантових наносистем виникає питання про вплив форми, розмірів квантових точок (КТ), що представляють собою область з трьохвимірним обмеженням об'єму, і якості гетерограниці на квантові стани як вільних, так і зв'язаних носіїв заряду. Відомо, що електронні характеристики напівпровідникових приладів в значній мірі залежать від властивостей інтерфейсів границь поділу між різними матеріалами в гетероструктурах. Наприклад, в гетероструктурах InAs/GaAs (CdTe/ZnTe) з КТ якість гетерограниці (квантова точка – матриця) визначає транспортні (рухливість, час життя нерівноважних носіїв заряду) характеристики носіїв заряду і оптичні властивості оптоелектронних приладів на КТ, оскільки наявність гетерограниці призводить до появи додаткового механізму розсіювання носіїв заряду на шорховатостях поверхні [1,2].

В роботі [3] пропонується новий метод оцінки якості поверхні гетерограниці шляхом аналізу спектрів циклотронного резонансу (ЦР). Він дозволяє оцінити поздовжні розміри неоднорідностей на гетерограниці і тип розсіювання в наногетероструктурі. Зокрема, у випадку коротдіючого розсіювання, форма лінії ЦР має характерні особливості у вигляді квантових осциляцій [4].

Теоретичне дослідження впливу розмірів, форми КТ і якості напруженої гетерограниці на електронні властивості наногетеросистеми пов'язане з проблемою знаходження розв'язку задачі про квантові стани системи, що перебувають в потенційній ямі довільної просторової форми, і задачею про деформацію матеріалу КТ і матриці.

Зокрема, в роботі [5] запропоновано функціональний метод теорії збурення форми поверхні наносфери та проаналізовано вплив деформації форми сферичного нанооб'єкта на квантові стани носіїв заряду в ньому. Цей метод, на відміну від відомих [6-10] базується на розкладанні квантових величин в функціональний ряд по варіації форми поверхні нанооб'єктів, а не енергії. Слід зауважити, що задача [5] була розв'язана для окремо взятого нанооб'єкта без врахування матриці і деформації ґратки матеріалу квантової точки з потенційною ямою з нескінченно високими стінками.

У даній роботі здійснено розвиток теорії збурення напруженої границі поділу "квантова точка-матриця", за допомогою якої досліджено вплив неоднорідно-деформованої гетерограниці на квантово-механічні стани зарядів, локалізованих всередині квантової точки.

1. ТЕОРЕТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НАПРУЖЕНОЇ ГЕТЕРОСИСТЕМИ З КОГЕРЕНТНО-НАПРУЖЕНИМИ КТ

Розглядається гетеросистема InAs/GaAs з когерентно-напруженими КТ InAs. Форма збуреного сферичного наноб'єкта описується рівнянням

$$R(\theta) = R_0 \sqrt{1 + p^2 \cos^2(k\theta)}, \quad (1)$$

де γ, k, p – параметри, від значень яких залежить величина і вид варіації сферичної форми; θ – кут між радіусом-вектором, наведеним з початку координат до точки на поверхні і віссю Z. Щоб звести задачу з великою кількістю КТ до задачі з одною КТ, зроблено наступне наближення. Енергію попарної пружної взаємодії КТ замінено енергією взаємодії кожної КТ з усередненим полем пружної деформації $\sigma_{ef}(N-1)$ всіх інших КТ ($N-1$). Оскільки постійна ґратки матеріалу InAs більша, ніж матриці GaAs, то при гетероепітаксії в межах псевдоморфного росту InAs на GaAs, матеріал InAs піддається деформації стиску, а GaAs – деформації розтягу. Тому деформовану сферичну КТ можна представити пружним дилатаційним нановключенням з радіусом $R(\theta)$, поміщеним в порожнину матриці GaAs радіусом R_1 . Об'єм порожнини менший від об'єму наноб'єкта на ΔV .

Для визначення компонент тензора деформації використовували рівняння рівноваги

$$\vec{\nabla} \text{div} \vec{u} = 0, \quad (2)$$

з наступними граничними умовами для сферичної КТ:

$$\begin{cases} 4\pi R^2(\theta) \left(u_r^{(2)}|_{r=R(\theta)} - u_r^{(1)}|_{r=R(\theta)} \right) = \Delta V, \\ \sigma_{rr}^{(1)}|_{r=R(\theta)} = \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R(\theta)} - P_L, \\ \sigma_{rr}^{(2)}|_{r=R_1} = -\sigma_{ef}(N-1), \end{cases} \quad (3)$$

де $P_L = \frac{2\alpha}{R(\theta)}$ – лапласівський тиск; $u_r^{(i)}$ – радіальна компонента зміщення атомів в i -тому напівпровідниковому матеріалі, α – поверхнева енергія КТ InAs. Різниця об'ємів пружного дилатаційного мікрровключення і порожнини в матриці GaAs дорівнює

$$\Delta V = 4\pi R^3(\theta) f. \quad f = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(1)}} \approx 7\% \quad - \text{параметр}$$

невідповідності постійних ґратки матеріалів КТ і матриці.

Розв'язок рівняння (2) має вигляд:

$$u_r^{(i)}(r, \theta) = C_1^{(i)} r + \frac{C_2^{(i)}}{r^2}, \quad i = \begin{cases} 1 \equiv \text{InAs} \\ 2 \equiv \text{GaAs} \end{cases} \quad (4)$$

Поле зміщень визначають наступні компоненти тензора деформації:

$$\varepsilon_{rr}^{(1)}(r, \theta) = \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(1)}(r, \theta) = \varepsilon_{\theta\theta}^{(1)}(r, \theta) = C_1^{(1)}, \quad (5)$$

$$\varepsilon_{rr}^{(2)}(r, \theta) = C_1^{(2)} - \frac{2C_2^{(2)}}{r^3}, \quad (6)$$

$$\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(2)}(r, \theta) = \varepsilon_{\theta\theta}^{(2)}(r, \theta) = C_1^{(2)} + \frac{2C_2^{(2)}}{r^3}. \quad (7)$$

Механічні напруження в матеріалах квантової точки $\sigma_{rr}^{(1)}$ і матриці $\sigma_{rr}^{(2)}$ дорівнюють:

$$\sigma_{rr}^{(i)} = \frac{E_i}{(1+\nu_i)(1-2\nu_i)} \left[(1-\nu_i) \varepsilon_{rr}^{(i)}(r, \theta) + \nu_i \left(\varepsilon_{\varphi\varphi}^{(i)}(r, \theta) + \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)}(r, \theta) \right) \right], \quad (8)$$

де ν_i , E_i – коефіцієнт Пуассона і модуль Юнга матеріалу КТ та оточуючої матриці. Коефіцієнти $C_1^{(1)}$, $C_1^{(2)}$, $C_2^{(2)}$ знаходяться з розв'язку системи рівнянь (3) з урахуванням (4) - (8).

Потенційна енергія частинки в напруженій наногетеросистемі InAs/GaAs з деформованими сферичними КТ InAs визначається формулою:

$$U^{(e,h)}(r, \theta) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq R(\theta), \\ U^{(e,h)} = \Delta E_{c,v}(0) - |a_{c,v}^{(1)} \varepsilon^{(1)}(r, \theta) - |a_{c,v}^{(2)} \varepsilon^{(2)}(r, \theta)|, & R(\theta) \leq r \leq R_1, \end{cases} \quad (9)$$

де $\Delta E_{c,v}(0)$ – глибини потенційних ям для електрона і дірки в недеформованій гетероструктурі InAs/GaAs, $\varepsilon^{(i)}(r, \theta) = S p \varepsilon^{(i)}(r, \theta)$ – параметр деформації i -того напівпровідникового матеріалу, де

$$S p \varepsilon^{(i)}(r, \theta) = \varepsilon_{rr}^{(i)}(r, \theta) = \varepsilon_{\varphi\varphi}^{(i)}(r, \theta) = \varepsilon_{\theta\theta}^{(i)}(r, \theta).$$

Енергетичний спектр зарядів локалізованих в деформованій КТ знаходився з розв'язку рівняння Шредінгера (10) спільно з рівнянням механічної рівноваги (2) [11]

$$\hat{H}_{e,h} \psi^{(e,h)}(r, \theta, \varphi) = E^{(e,h)} \psi^{(e,h)}(r, \theta, \varphi) \quad (10)$$

з гамільтоніаном

$$\hat{H}_{e,h} = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m_i^{*(e,h)}} \vec{\nabla} + U^{(e,h)}(r, \theta),$$

$m_i^{*(e,h)}$ – ефективні маси електрона і дірки.

Спектр енергії частинки $E(\varepsilon(r, \theta))$ в неоднорідно-деформованій потенційній ямі, що має рівняння поверхні (1), був знайдений використовуючи вираз

$$E(\varepsilon(r, \theta)) \approx E_{nl}^0(\varepsilon(r, \theta)) \left[1 - \frac{\delta R^2(\varepsilon(r, \theta))}{R_0^2} \right]. \quad (11)$$

Для поверхні наноб'єктів (1), знайдений в першому порядку малості спектр енергії частинки в потенційній ямі

$$E_{nlm}^1 = E_{nl}^0 \left\{ 1 - p^2 \left[4 \left(\frac{m^2}{l(l+1)} \right)^{\frac{3}{2}} - 3 \left(\frac{m^2}{l(l+1)} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^2 \right\} \quad (12)$$

Рівняння (10) для поправки першого порядку малості до хвильової функції запишеться в наступному вигляді:

$$\Delta \Psi_{nlm}^1(r, \theta, \varphi) + k_1^2 \Psi_{nlm}^1(r, \theta, \varphi) = -\frac{2m_1^* E_{nlm}^1}{\hbar^2} \Psi_{nl}^0(\rho, \theta_1, \varphi_1), \quad 0 \leq r \leq R(\theta), \quad (13)$$

$$\Delta \Psi_{nlm}^2(r, \theta, \varphi) + k_2^2 \Psi_{nlm}^2(r, \theta, \varphi) = -\frac{2m_2^* E_{nlm}^1}{\hbar^2} \Psi_{nl}^0(\rho, \theta_1, \varphi_1), \quad R(\theta) \leq r \leq R_1,$$

$$k_1^2 = \frac{2m_1^* E_{nl}^0(R_0)}{\hbar^2},$$

$$k_2^2 = \frac{2m_2^*}{\hbar^2} (U^{(e,h)}(r, \theta) - E_{nl}^0(R_0)).$$

Використовуючи метод функції Гріна можна знайти розв'язок задачі (13). Рівняння для функції Гріна задачі (13) мають такий вигляд:

$$\Delta G_1(r, \rho) + k_1^2 G_1(r, \rho) = -\delta(r - \rho),$$

$$\Delta G_2(r, \rho) + k_2^2 G_2(r, \rho) = -\delta(r - \rho),$$

$$G_1(r, \rho)|_{r=R(\theta)} = G_2(r, \rho)|_{r=R(\theta)},$$

В декартовій системі координат з початком в центрі кулі, функція Гріна для областей всередині і зовні наноб'єкта має вигляд:

$$G_1(r, \rho) = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{\exp\{-ik_1|r-\rho|\}}{|r-\rho|} - \frac{\exp\{-ik_1|r+\rho-R(\theta, \varphi)\frac{\rho}{\rho}|\}}{|r+\rho-R(\theta, \varphi)\frac{\rho}{\rho}|} \right], \quad 0 \leq r \leq R(\theta),$$

$$G_2(r, \rho) = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{\exp\{-ik_2|r-\rho|\}}{|r-\rho|} - \frac{\exp\{-ik_2|r+\rho-R(\theta, \varphi)\frac{\rho}{\rho}|\}}{|r+\rho-R(\theta, \varphi)\frac{\rho}{\rho}|} \right], \quad R(\theta) \leq r \leq R_1.$$

Використовуючи розклад

Актуальні проблеми фізики, математики та інформатики. № 6, 2014

$$\frac{\exp\{-ik|r-\rho|\}}{|r-\rho|} = -k \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \begin{cases} j_l(-k \cdot r) h_l(-k \cdot \rho) P_l(\cos \gamma), & r < \rho, \\ j_l(-k \cdot \rho) h_l(-k \cdot r) P_l(\cos \gamma), & r > \rho, \end{cases}$$

$$P_l(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1),$$

де γ – кут між r і ρ ,

функції Гріна в сферичних координатах запишуться:

$$G_1(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1) = \frac{1}{4\pi} \left[-k_1 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l 4\pi \times \right.$$

$$\times \begin{cases} j_l(-k_1 \cdot r) h_l(-k_1 \cdot \rho) Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1), & r < \rho, \\ j_l(-k_1 \cdot \rho) h_l(-k_1 \cdot r) Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1), & r > \rho \end{cases},$$

$$0 \leq r \leq R(\theta),$$

$$G_2(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1) = \frac{1}{4\pi} \left[-k_2 \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l 4\pi \times \right.$$

$$\times \begin{cases} j_l(-k_2 \cdot r) h_l(-k_2 \cdot \rho) Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1), & r < \rho, \\ j_l(-k_2 \cdot \rho) h_l(-k_2 \cdot r) Y_{lm}(\theta, \varphi) Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1), & r > \rho \end{cases},$$

$$R(\theta) \leq r \leq R_1.$$

Хвильова функція частинки в неоднорідно-деформованому сферичному наноб'єкті, що знаходиться в матриці має наступний вигляд:

$$\Psi_{nlm}^1(r, \theta, \varphi) = k_1 \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \left\{ \int_{R(\theta)}^r G_1(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1) + \int_r^{R_1} G_1(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1) \right\} \times$$

$$\times \Psi_{nl}^0(\rho, \theta_1, \varphi_1) \rho^2 \sin \theta_1 d\rho d\theta_1 d\varphi_1 +$$

$$+ k_2 \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \left\{ \int_{R(\theta)}^r G_2(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1) + \int_r^{R_1} G_2(r, \rho, \theta, \varphi, \theta_1, \varphi_1) \right\} \times$$

$$\times \Psi_{nl}^0(\rho, \theta_1, \varphi_1) \rho^2 \sin \theta_1 d\rho d\theta_1 d\varphi_1,$$

$$\Psi_{nl}^0(\rho, \theta_1, \varphi_1) = \begin{cases} R_{1nl}(\rho) Y_{lm}, & 0 \leq \rho \leq R_0, \\ R_{2nl}(\rho) Y_{lm}, & R_0 \leq \rho \leq R_1. \end{cases}$$

2. Результати розрахунків та їх обговорення

Проводився розрахунок компонент тензора деформації матеріалу аксіально - деформованої сферичної квантової точки в матриці та був знайдений спектр енергії $E(\varepsilon(r, \theta))$ частинки в неоднорідно-деформованій потенціальній ямі. Розрахунок здійснювався на прикладі наногетеросистеми InAs/GaAs з такими параметрами: $R_0 = 100 \text{ \AA}$, $R_1 = 500 \text{ \AA}$, $a_c^{(1)} = -5.08 \text{ eV}$, $a_c^{(2)} = -7.17 \text{ eV}$, $a_1 = 6.08 \text{ \AA}$, $a_2 = 5.65 \text{ \AA}$, $m^{(1)} = 0.057 m_0$, $m^{(2)} = 0.065 m_0$,

$\alpha = 0.657 H / m$, $\Delta E_c(0) = 0.83 eV$. Енергія відраховується від дна потенціальної ями.

На рис.1 приведено результати числових розрахунків залежностей енергії електрона $E(\varepsilon(r, \theta))$ в основному і збудженому станах від розміру КТ InAs в неоднорідно-деформованій потенційній ямі.

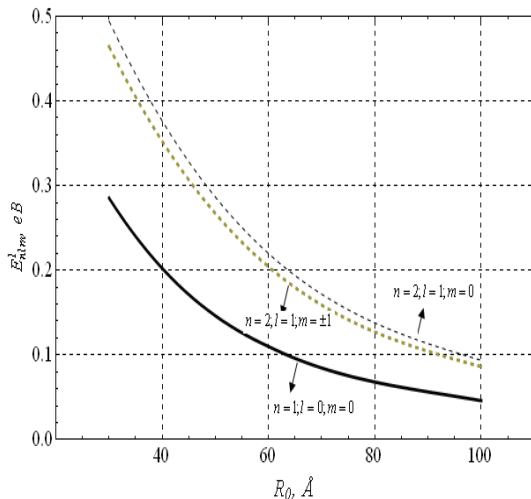


Рисунок 1. Спектр енергії частинки в неоднорідно-деформованій потенційній ямі.

3. Висновки

1. Показано, вплив неоднорідно-деформованої КТ на квантові стани носіїв заряду в ній, зокрема видно, що енергія частинки $E(\varepsilon(r, \theta))$ в неоднорідно-деформованій потенційній ямі більша за енергію частинки в недеформованій потенційній ямі. Результати даної роботи можуть бути використані для оцінки якості гетерограниці.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

[1] Sakaki H. Interface Roughness Scattering in GaAs-AlAs Quantum Wells / H.Sakaki, T.Noda, K.Hirakawa, M.Tanaka, T.Matsusue // Applied Physics Letters.— 1987.— 51.— 1934.

[2] Vurgaftman I. TE - and TM -polarized roughness-assisted free-carrier absorption in quantum wells at midinfrared and terahertz wavelengths / I.Vurgaftman, J.R.Meyer // Phys.Rev.— 1999.— B60.— 14294.

[3] Васильев Ю.Б. Влияние качества гетерограниц на спектры циклотронного резонанса гетероструктур InAs/(AlGa)Sb / Ю.Б.Васильев, С.Д.Сучалкин, С.В.Иванов, Б.Я.Мельцер, А.Ф.Цацульников, П.В.Неклюдов, П.С.Копьев // ФТП.— 1997.— 31(10).— 1246.

[4] Ando. T. Theory of cyclotron resonance line shape in a two-dimensional electron system / T. Ando // J. Phys. Soc. Jpn. — 1975.— 38.— 989.

[5] Дзюба В.П. Квантово-размерные состояния деформированной наносферы / В. П. Дзюба, Ю. Н. Кульчин, В. А. Миличко. // ФТТ.— 2014.— 56(2).— 355.

[6] Морс Ф.М. Методы теоретической физики / Ф.М. Морс, Г. Фешбах. // Том 1. — М.: ИЛ, 1958.

[7] Шмелев А.Б. УФН —Т. 106. — вып. 3.— 1972. —с. 459.

[8] Ландау Л.Д. Квантовая механика / Л.Д. Ландау, Е. М. Лифшиц //— М.: Физ- матлит, — Издание 5-е. — 2002.—с. 808.

[9] Efros Al.L., Rodina A.V. //Phys. Rev. B 47. — 1993. —10 005.

[10] Мигдал А.Б. Качественные методы в квантовой теории / А.Б. Мигдал // —Наука: М. — 1975. —335 с.

[11] Б.В. Новиков, Г.Г. Зегря, Р.М. Пелешак, О.О. Данькив, В.А. Гайсин, В.Г. Талалаев, И.В. Штром, Г.Э. Цырлин. Барические свойства квантовых точек InAs // ФТП.— 2008.— 42(9).— 1094.